Title	圧電半導体中の音波伝播
Author(s)	小林, 迪助; 竹沢, 攻一
Citation	物性研究 (1977), 27(6): 231-236
Issue Date	1977-03-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/89329
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

圧電半導体中の音波伝播

新潟大・理　小　林　迪　助
竹　沢　攻　一

(1月 26日受理)

§1. 音波物性と云われる学問分野は，ここ 20年間に急速な進歩を遂げ，現在も続いている。多くの秀れた教科書にその内容が書かれている。[1)〜4)] この報告では，圧電半導体中の音波伝播について，格子振動の光学モードも含めて調べられる。10GHz位の高振動数領域になると，プラズモンからの影響があることが指摘されている。[5,6)] その程度の高振動数領域で格子振動の光学モードはどの程度，音速に影響を及ぼすだろうかということが以下の計算を行なわせた理由である。計算の結果は光学モードが測定に十分な位の大きさの寄与を音速に与えていることが分る。

§2. ウルツ鉱型圧電半導体において，縦の超音波の伝播方向が結晶の c 軸方向に並行である場合には、音波によって誘記される分極は唯一つの圧電係数 e_{33} によって表現される。[7)] 従って我々は簡単の為，圧電性結晶である CdS について，上記の配置を考え，結晶の c 軸方向を z 軸に選ぶことにする。 電子と音響フォノンとの相互作用としては，圧電型の結合だけを考え，変形ポテンシャルによる結合は無視する。この無視は CdS において，振動数が 10^{13} sec^{-1} まで許される。[8)] 電子，弾性波及び光学型格子振動が互いに相互作用している系のラグランジアン密度は次の様に与えられる。

$$\mathscr{L} = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial w}{\partial t}\right)^2 + \frac{1}{2}\rho\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)^2 - \Big\{\frac{1}{2}b_{11}\,w^2 + \frac{1}{2}\kappa\left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)^2 - \frac{b_{22}}{2}E^2 - b_{12}\,w\cdot E - e_p\frac{\partial u}{\partial z}\cdot E\Big\} \tag{1}$$

(1) 式右辺第 1 項から第 3 項までは，それぞれ電子，光学型格子振動及び弾性波の運動エネルギー密度である。w は正負イオンの相対的な変位を質量密度 ρ の平方根で割ったものであり， u はイオンの変位である。(1) 式の {　} の中は ポテンシャルエネル

ギー密度であり，κ は弾性定数，e_p は圧電係数である。b_{11}，b_{12}，b_{22} は容易に決定することができて，

$$b_{11} = \omega_T^2,\quad b_{12} = \sqrt{\frac{\varepsilon_\infty}{4\pi}}\,(\omega_L^2-\omega_T^2)^{1/2},$$
$$b_{22} = (\varepsilon_\infty - 1)/4\pi \tag{2}$$

で与えられる。ω_T，ω_L は光学型格子振動の長波長極限における横及び縦の振動数で，ε_∞ は高周波誘電率である。(1) 式からラグランジュの運動方程式を求めると，

$$\frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + \omega_T^2 w - b_{12} E = 0\ , \tag{3}$$

$$\rho\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \kappa\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + e_p\frac{\partial E}{\partial z} = 0 \tag{4}$$

である。(1) からハミルトニアン密度 $\mathscr{H}$ を求めると次式が得られる。

$$\mathscr{H} = \frac{m}{2}v^2 + \frac{1}{2}\left\{\left(\frac{\partial w}{\partial t}\right)^2 + \omega_T^2 w^2\right\} + \frac{\rho}{2}\left\{\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)^2 + \frac{\kappa}{\rho}\left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)^2\right\} - b_{12}\,w\cdot E - \frac{b_{22}}{2}E^2 - e_p\frac{\partial u}{\partial z}\cdot E \tag{5}$$

(5) 式から分極 P が次の様に求まる。

$$P = b_{12}w + e_p\frac{\partial u}{\partial z} + b_{22}E \tag{6}$$

次に自由電荷がない場合のポアソン方程式と (3) 式とを連立して長波長極限をとると，

$$\left(\varepsilon_0 - \frac{4\pi e_p^2}{\kappa}\right)\varepsilon_\infty^{-1} = \left(\frac{\omega_L}{\omega_T}\right)^2 \tag{7}$$

の関係が得られる。圧電分極の為に静的誘電率 ε_0 が実質的に小さくなり，ω_L と ω_T の間の禁止振動数ギャップを狭めている。$\varepsilon_0 - 4\pi e_p^2/\kappa$ をあらためて静的誘電率と見なせは，(7) 式は Lyddane-Sacks-Teller の関係式を与えている。一方自由電荷がある場合のポアソン方程式からは，

$$E = -\frac{1}{\varepsilon_\infty}\cdot\left(4\pi b_{12}w + 4\pi e_p\frac{\partial u}{\partial z} - E_{\text{クーロン}}(r,t)\right) \tag{8}$$

が得られる。ここで$E_{\text{クーロン}}(r,t)$は自由電荷のクーロン場を表わしており，

$$E_{\text{クーロン}}(r,t) = -\nabla\cdot\int\frac{\rho(r',t)}{|r-r'|}d\vec{r'}$$

である。

§3. 場をも含めた全系のハミルトニアン密度を書き下す為に(1)式に$E^2/8\pi$を加えたラグランジアン密度より出発する。これから全系のハミルトニアン密度を求めると次の表式が得られる。

$$\mathscr{H} = \frac{m}{2}v^2 + \frac{1}{2}\left\{\left(\frac{\partial w}{\partial t}\right)^2 + \omega_T^2 w^2\right\} + \frac{\rho}{2}\left\{\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)^2 + \frac{\kappa}{\rho}\left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)^2\right\} + \frac{\varepsilon_\infty}{8\pi}E^2 \tag{9}$$

(9)式に(8)式を代入し，且つ電子に関しては創生，消滅演算子a^+, aを，イオン変位に関しては格子振動の基準座標を使って(9)を書き換えると，

$$\mathscr{H} = H_0 + H_c + H_{int} \tag{10}$$

の3つの部分に分けられ，各々は次の通りである。

$$H_0 = \sum_k \varepsilon(k)\, a_k^+ a_k + \frac{1}{2}\sum_q\left\{P_q^* P_q + \omega_L^2 Q_q^* Q_q\right\}$$
$$+ \frac{1}{2}\cdot\sum_q\left(p_q^* p_q + \Omega_q^2 q_q^* q_q\right), \tag{11a}$$

$$H_c = \frac{1}{2}\cdot\sum_{k,k',q}\varphi_q\, a_{k+q}^+\, a_{k'-q}^+\, a_{k'}\, a_k\,, \tag{11b}$$

$$H_{int} = \sum_q v_q Q_q \rho_{-q} + \sum_q v_q^p q_q \rho_{-q} + \sum_q I_q Q_{-q} q_q\,, \tag{11c}$$

但し，

$$v_q = \frac{ie}{q}\sqrt{\frac{4\pi}{\varepsilon_\infty}}\left(\omega_L^2 - \omega_T^2\right)^{1/2}, \quad v_q^p = -\frac{4\pi e\, e_p}{\varepsilon_\infty\sqrt{\rho}},$$

$$I_q = i\sqrt{\frac{4\pi}{\varepsilon_\infty \rho}}(\omega_L^2-\omega_T^2)^{1/2}\cdot e_p q , \quad \varphi_q = \frac{4\pi e^2}{\varepsilon_\infty q^2} ,$$

$$\Omega_q^2 = (\frac{\kappa}{\rho} + \frac{4\pi e_p^2}{\varepsilon_\infty \rho}) q^2 , \quad \rho_q = \sum_k a_k^+ a_{k+q} . \tag{12}$$

(11a) の第2項が光学フォノン，第3項が音響フォノンである。(11a) 及び (12)式から分るように互いに相互作用のない時の音速 s_0 は,

$$s_0 = (\kappa/\rho + 4\pi e_p^2/\varepsilon_\infty \rho)^{1/2}$$

で与えられることが分る。(11c) 式の3項は相互作用項である。(10) (11) 式を使って電子密度のフーリィエ成分 ρ_q 及び Q_q，q_q に関する運動方程式を RPA 近似のもとで解くと，それぞれ,

$$\varepsilon(q,\omega)\ \rho_q + \frac{\varepsilon(\rho,\omega)-1}{\varphi_q}(v_q^p q_p + v_q Q_q) = 0 , \tag{13}$$

$$(\omega^2-\omega_L^2)Q_q - v_{-q}\rho_q - I_q q_q = 0, \tag{14}$$

$$(\omega^2-\Omega_q^2)q_q - v_{-q}^p \rho_q - I_{-q} Q_q = 0 \tag{15}$$

となり，これから結合波の分散式として次式を得る。

$$\varepsilon(q,\omega)(\omega^2-\omega_T^2)\cdot(\omega^2-\frac{\kappa}{\rho}q^2) - \frac{4\pi e_p^2}{\varepsilon_\infty \rho} q^2(\omega^2-\omega_T^2)$$
$$- (\omega_L^2-\omega_T^2)\cdot(\omega^2-\frac{\kappa}{\rho}q^2) = 0 , \tag{16}$$

但し (13) 式中の $\varepsilon(q,\omega)$ は電子ガスの誘電率で,

$$\varepsilon(q,\omega) = 1 + \varphi_q \sum_p \frac{n(p+q)-n(p)}{\hbar\omega - \varepsilon(p+q)+\varepsilon(p) + i\delta}$$

である。n(p) はフェルミ・デイラック分布函数である。(16) 式は量子力学的に導かれた表式であるが，これと同一の表式は (3)，(4)式及びマクスウェル方程式，ポアソン方程式，ボルツマン方程式を連立して解いても得られる。但し内容は古典的である。以上

の考察から音波の分散式は次の様になる。

(A) 自由電荷のない場合には

$$\omega^2 = \left(s_0^2 - \frac{4\pi e_p^2}{\varepsilon_\infty \rho} \cdot \frac{\omega_L^2 - \omega_T^2}{\omega_L^2}\right) q^2 \tag{17}$$

(B) 自由電荷のある場合には (16) 式より,

$$\omega^2 = q^2 \left[s_0^2 - \frac{4\pi e_p^2}{\varepsilon_\infty \rho} \left\{ 1 - \frac{\omega_T^2}{\omega_T^2 + \dfrac{\omega_L^2 - \omega_T^2}{\varepsilon(q,\omega)}} \cdot \frac{1}{\varepsilon(q,\omega)} \right\} \right] \tag{18}$$

(C) 光学フォノンを考慮に入れない場合,

$$\omega^2 = \left[s_0^2 - \frac{4\pi e_p^2}{\varepsilon_\infty \rho} \cdot \left\{ 1 - \frac{1}{\varepsilon(q,\omega)} \right\} \right] \cdot q^2 \tag{19}$$

(19) 式はいろんな人によって別な方法で導かれている。[9,10] (18) 式は光学フォノンを考慮したことによって (19) 式が変形されたものである。(18) 式から分るように光学フォノンの影響は (19) 式中の $1/\varepsilon(q,\omega)$ の前にかかる係数として現われている。光学フォノンの影響を評価する為に (18) 式と (19) 式の音速の差をとり，その絶対値を見ると,

$$\triangle s = \frac{2\pi e_p^2}{s_0 \, \varepsilon_\infty \rho \, \varepsilon(q,\omega)} \cdot \left\{ 1 - \frac{\omega_T^2}{\omega_T^2 + \dfrac{\omega_L^2 - \omega_T^2}{\varepsilon(q,\omega)}} \right\} \tag{20}$$

であり，ここに $e_p = 1.32 \times 10^5$ cgs. esu[11], $\omega_T = 261 cm^{-1}$, $\omega_L = 295 cm^{-1}$, $\rho = 4.819\ g/cm^3$, $\varepsilon_\infty = 9.72$, $s_0 = 4.3 \times 10^5\ cm/sec$ そして $\varepsilon(q,\omega)$ として5位の値をとってやると $\triangle s/s = O(10^{-4})$ となる。 現在の音速の測定技術は7桁まで可能であるから十分に光学フォノンの影響を測定できる。

終りに以上の議論では音波の減衰のことには特に触れなかったが，我々の定式化の範囲内の減衰に関する表式は出ている。しかしながら我々の取扱いでは音波に伴う電子密度の変化及び電子密度の変化によるフェルミエネルギーの変化は考慮されない。10 G

H_Z 以上の関連する仕事もあり[12]，これらの点も併せて検討されなければならない。

ご批判をお願いします。有益な議論をして下さった，横田伊佐秋先生に感謝いたします。

文献5）を紹介し，送っていただいた電総研の鹿児島誠一氏にお礼申し上げます。

参　考　文　献

1) 日本物理学会編：論文選集　音波物性　1967
2) 和田八三久編：固体の音波物性　槇書店　1967
3) 御子柴宣夫：音波物性　三省堂　1973
4) W.P.Mason and R.N.Thurston編: Physical Acoustics (Academic Press)
5) L.C.M.Miranda and D.ter Haar : Revista Brasileira de Fisica **2**(1972) 77
6) S.Kagoshima and T.Ishiguro : J. Phys. Soc. Japan **40**(1976) 784
7) 小川智哉：物性　**3**(1962) 225
8) H.N.Spector : Phys. Rev. **127**(1962) 1084
9) 横田伊佐秋：物性**4**(1963) 343
10) 山田一雄：超高周波電子音響学シンポジウム　1965
11) D.Berlincourt, H.Jaffe and L.R.Shiozawa; Phys. Rev. **129**(1963) 1009
12) D.C.Carlson and A.Segmüller: Phys. Rev. Letters **27**(1971) 195